(0112) INTERNATIONAL APPLICATION PUBLISHED UNDER THE PATENT COOPERATION TREATY (PCT)

(19) World Intellectual Property Organization

International Bureau

(43) International publication date 4 August 2005 (04.08.2005)



(10) International publication number

WO 2005/070879 A1

(51) International patent classification⁷: 253/22, 291/10, 255/50

C07C 253/20,

(21) International application number:

PCT/EP2005/000361

(22) International filing date:

15 January 2005 (15.01.2005)

(25) Language of filing:

German

(26) Language of publication:

German

- (30) Data relating to the priority: DE 10 2004 003 953.4 26 January 2004 (26.01.2004)
- (71) Applicant (for all designated States except US): CLARIANT GMBH [DE/DE]; Brüningstrasse 50, 65929 Frankfurt am Main (DE).
- (72) Inventors; and
- (75) Inventors/Applicants (US only): MEUDT, Andreas [DE/DE]; Fischbacher Weg 4, 65719 Hofheim (DE). SCHERER, Stefan [DE/DE]; Wilhelm-Leuschner-Strasse 212, 64347 Griesheim

(DE). NERDINGER, Sven [DE/DE]; Andresenstrasse 5, 82008 Unterhaching (DE).

- (74) Attorneys: HÜTTER, Klaus, etc.; Clariant GmbH, Patente, Marken und Lizenzen, Am Unisys-Park 1, 65843 Sulzbach (DE).
- (81) Designated states (unless otherwise indicated, for every kind of national protection available): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.
- (84) Designated states (unless otherwise indicated, for every kind of regional protection available): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), Eurasian (AM, AZ, BY, KG, KZ,

[continued on next page]

As printed

(54) Title: METHOD FOR PRODUCING NITRILES AND ISONITRILES BY USING DEHYDRATION REACTORS WITH PROPANEPHOSPHONIC ACID ANHYDRIDES

(54) Bezeichnung: VERFAHREN ZUR HERSTELLUNG VON NITRILEN UND ISONITRILEN DURCH DEHYDRATISIE-RUNGSREAKTIONEN MIT PROPANPHOSPHONSÄUREANHYDRIDEN

$$R-C \equiv N$$
 (II)

$$\begin{array}{c} R' \\ I \\ \text{cyclo-(-O-P-)}_x \end{array} \tag{I)}$$

(57) Abstract: The invention concerns a method for producing: a) nitriles of formula (II) and; b) isonitriles of formula (III) by reacting: a) carboxylic acid amides (RCO-NH2), ammonium salts of carboxylic acids (RCOO-NH4+) or carboxylic acids in the presence of ammonia or ammonium salts (RCOOH +NH3, RCOOH + NH4+) or; b) formamides (H-CO-NHR) or mixtures of amines with formic acid, with cyclic phosphonic acid anhydrides while eliminating water at a temperature ranging from -30 to +120 °C, in which R represents an arbitrarily substituted linear or branched C1-C8 alkyl

radical, a C₃-C₁₀ cycloalkyl radical, alkenyl radical, alkynyl radical or an aryl radical or heteroaryl radical. As a cyclic phosphonic acid anhydride, a 2,4,6, substituted 1,3,5,2,4,6-trioxatriphosphinane-2,4,6-trioxide of formula (I) is used, in which: x = 3, 4 or 5; R', independent of one another, represents open-chain or branched, saturated or unsaturated, straight-chain C₁ to C₁₆ alkyl radicals or cyclic C_5 to C_{16} alkyl radicals or aryl or heteroaryl.

(57) Zusammenfassung: Verfahren zur Herstellung von a) Nitrilen der Formel (II) und b) Isonitrilen der Formel (III) durch Umsetzung von a) Carbonsäureamiden (RCO-NH2), Ammoniumsalzen von Carbonsäuren (RCOO-NH4+) oder Carbonsäuren in Gegenwart von Ammoniak oder Ammoniumsalzen (RCOOH +NH3, RCOOH + NH4+) oder b) Formamiden (H-CO-NHR) oder Mischungen von Aminen mit Ameisensäure, mit cyclischen Phosphonsäureanhydriden unter Abspaltung von Wasser, bei einer Temperatur im Bereich von -30 bis + 120°C, wobei R für einen beliebig substituierten linearen oder verzweigten C₁-C₈-Alkylrest, einen C₃-C₁₀-Cycloalkyl-, Alkenyl-, Alkinyl- oder einen Aryl- oder Heteroarylrest steht. Als cyclisches Phosphonsäureanhydrid wird insbesondere ein 2,4,6-substituieries 1,3,5,2,4,6-trioxatriphosphinan-2,4,6-trioxid der Formel (I), worin x = 3, 4 oder 5 ist und R' unabhängig voneinander für offenkettige oder verzweigte, gesättigte oder ungesättigte, geradkettige C1, bis C16-Alkylreste oder cyclische C3 bis C₁₆-Alkylreste oder für Aryl oder Heteroaryl steht, eingesetzt.

WO 2005/070879 A1

MD, RU, TJ, TM), European (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

For an explanation of the two-letter codes and the other abbreviations, reference is made to the explanations ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") at the beginning of each regular edition of the PCT Gazette.

Published:

- With International Search Report.
- Before the expiration of the time limit for amending the claims and to be republished in the event of receipt of amendments.